

## Si 結晶中の金属不純物の安定性に与える平面応力の影響 Influence of Plane Stress on the Stability of Metal Impurities in Si Crystal

岡山県大院情報系工<sup>1</sup>, 岡山県大情報工<sup>2</sup>, 株式会社 SUMCO<sup>3</sup>

○(M1)岩城浩也<sup>1</sup>, 末岡浩治<sup>2</sup>, 鳥越和尚<sup>3</sup>, 小野敏昭<sup>3</sup>

Graduate School of Engineering, Okayama Pref. Univ.<sup>1</sup>, Okayama Pref. Univ.<sup>2</sup>,  
SUMCO CORPORATION<sup>3</sup>,

○Hiroya Iwashiro<sup>1</sup>, Koji Sueoka<sup>2</sup>, Kazuhisa Torigoe<sup>3</sup>, Toshiaki Ono<sup>3</sup>

E-mail: iwashiro.opu@gmail.com

LSI の製造工程において, Si ウェーハの表面近傍には様々な応力が負荷されている. この応力の大きさは LSI の構造にも依存するが, GPa オーダーに達している. LSI の性能に影響を与える金属不純物の熱平衡濃度に関して, 応力依存性に関する実験結果が報告され始めている[1]. 金属不純物は LSI の信頼性に影響を与えるため, その挙動の理解と制御は重要である.

本研究では GPa オーダーの応力が Si 結晶中の金属不純物の安定性に与える影響を第一原理計算により明らかにすることを目的としている. これまで等方性 (内部) 応力を扱ってきたが[2], 今回は, より現実に近い平面応力の場合を扱った.

計算モデルとして Si 原子 64 個からなる立方体モデルを用意した. そして, 金属原子 1 個をモデルに導入し, 第一原理計算により全エネルギーと応力負荷方向の体積変化量 (緩和体積) を求めた. さらに, これらの計算結果から金属の形成エンタルピーの応力依存性を算出した. 算出方法は前報[2]に示す. Zn, Cu, Ni, Co, Fe, Mn, Cr, Ti, Mo, W, Ta, Hf の 12 種類の金属を扱ったが, これらの原子半径を表 1 にまとめる. なお, 本計算では -3.0 GPa (圧縮) ~ +3.0 GPa (引っ張り) の平面応力を負荷し, 電子のスピン分極を考慮した.

Table 1 Atomic radius (Å).

Atom	Si	Zn	Cu	Ni	Co	Fe	Mn
Radius	1.17	1.39	1.28	1.25	1.25	1.27	1.26
Atom	Cr	Ti	Mo	W	Ta	Hf	
Radius	1.28	1.46	1.40	1.41	1.47	1.58	

Ni, Fe, Cu, Mo, W の形成エンタルピーについて, 平面応力を負荷しない時を基準として図 1 に示す. 横軸の応力は平均応力で示している. Ni は H-site に, 残りの 4 つの金属は T-site に配置している. また, 比較のため, [110] D-site に配置した格子間 Si (*I*) の結果も示す. 図 2 に示す等方性 (内部) 応力の結果と同じ平均応力で比較すると, 金属の形成エンタルピーに与える等方性応力と平面応力の影響の差は小さいことが分かる.

金属間で比較すると, 平面圧縮応力の場合, Ni の形成エンタルピーの変化が他の金属よりも大きいことが分かる. 形成エンタルピーの寄与の大部分を体積変化のエネルギーが占めている[2]ことから, Ni のみ T-site より隙間が狭い H-site に存

在しており, 隙間が広い T-site に存在する他の金属よりも緩和体積が大きいことがこの理由である. また, Mo, W の形成エンタルピーの変化は Fe, 平面圧縮応力の場合の Cu と大差ない. 表 1 より Mo と W は本研究で扱っている金属の中でも原子半径が大きい. しかし, これらのサイズが大きな金属であっても, 隙間が広い T-site に存在している場合は緩和体積が小さく, 形成エンタルピーへの影響が小さいと考えられる.

格子間シリコン (*I*) については, 形成エンタルピーの変化が金属よりも顕著に現れている. これは, 金属が T-site や H-site に存在してあまり大きな歪みをもたらさないのに対して, *I* は [110] D-site に存在して周囲に大きな局所圧縮歪みをもたらすためと考えられる[3].

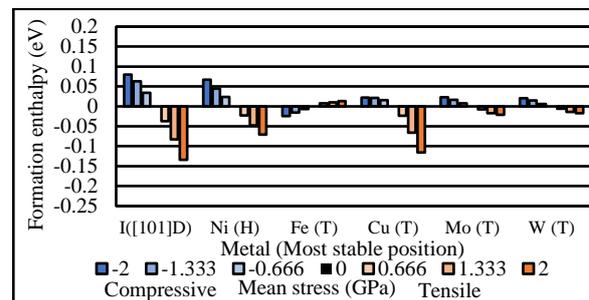


Fig. 1 Plane stress dependence of formation enthalpy.

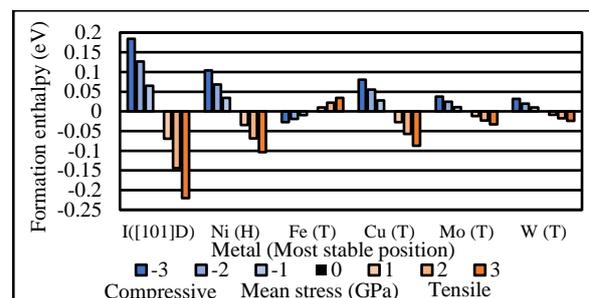


Fig. 2 Isotropic Stress dependence of formation enthalpy.

なお, 他の金属原子についての計算結果は, 当日報告する.

### 参考文献

- 鳥越他, 2018 年春応用物理学会予稿 18P-D103-8.
- 岩城他, 2019 年秋応用物理学会予稿 18p-PB4-5.
- K. Sueoka et al., ECS J. Solid State Sci. and Tech, 5(4), P3176-3195, (2016).